Journal of Agricultural Machinery
Vol. 9, No. 2, Fall - Winter 2019, p. 253-263

نشریه ماشین‌های کشاورزی
جلد ۹، شماره ۲، نیمسال دوم ۱۳۹۸، ص ۲۶۳-۲۵۳

توسعه و ارزیابی یک سامانه بینی الکترونیکی بر پایه حسگرهای نیمه‌هادی اکسید فلزی جهت تشخیص و جداسازی اسانس‌های لیمو

سید پویا فیاض[۱]- سید سعید محتسبی[۲*]- علی جعفری[۳]- عبدالناصر مسعودی[٤]

تاریخ دریافت: ۱۳۹۶/۰۹/۲۹
تاریخ پذیرش: ۱۳۹۷/۰۲/۰۹

چکیده

اسانس‌ها یا روغن‌های فرار ازجمله مواد موجود در گیاهان هستند که شامل مخلوط پیچیده‌ای از مـواد شـیمیایی آلـی مثـل ترپینوئیـدها، آلدئیـدها، الکل‌ها، استرها، ستن‌ها و غیره می‌باشند. اسانس‌ها از تقطیر مواد فرار موجود در اندام‌های مختلـف گیاهـان تـازه یـا خشـک بـه‌دسـت مـی‌آینـد و وزن مخصوص آن‌ها غالباً از آب کمتر است. اسانس‌ها را می‌توان به سه دسته طبیعی، مشابه طبیعی و مصنوعی تقسیم کرد. روش‌هـای متـداول شناسـایی و ارزیابی اسانس‌های روغنی دارای نقطه‌ضعف‌هایی هستند. در این تحقیق یک سامانه بینی الکترونیکی شامل هفت حسگر نیمه‌هادی اکسید فلزی بـرای تشخیص و تفکیک هشت نوع اسانس لیموی تجاری توسعه داده‌شده و با استفاده از روش‌های تحلیل مؤلفه‌های اصلی، تحلیل تفکیـک خطـی و شـبکه عصبی مصنوعی ارزیابی شد. بر اساس نتایج حاصل از تحلیل داده‌های این سامانه، روش تحلیل مؤلفه‌هـای اصـلی بـا دو مؤلفـه اصـلی PC1 و PC2 توانست ۹۹ درصد از واریانس داده‌ها را پوشش دهد. همچنین تمامی حسگرها ضرایب لودینگ بالایی را از خود نشان دادند. روش‌های تحلیـل تفکیـک خطی و شبکه عصبی مصنوعی نیز به‌ترتیب با دقت بالای ۹۸٪ و۹۱٪ قادر به جداسازی نمونه‌ها بودند. بنابراین سـامانه بینـی الکترونیکـی پیشنهادشـده نشان داد که ابزار قابل‌اعتماد و کم‌هزینه‌ای جهت جداسازی اسانس‌های لیموی تجاری می‌باشد.

واژه‌های کلیدی: اسانس، بینی الکترونیکی، تحلیل تفکیک خطی، تحلیل مؤلفه‌های اصلی، شبکه عصبی مصنوعی

مقدمه

اسانس‌ها[۵] ترکیبات معطری هستند که در اندام‌های مختلف گیاهان یافت می‌شوند. به علت تبخیر در اثر مجاورت هوا در حرارت عادی، آن‌ها را روغن‌های فرار یا روغن‌های اتری و یا اسانس‌های روغنی نیز می‌نامند. اسانس‌ها به‌طورکلی بی‌رنگ هستند، به‌خصوص زمانی‌که تازه تهیه‌شده باشند. ولی در اثر مرور زمان به علت اکسیداسیون[۶] و رزینی شدن[۷]، رنگ آن‌ها تیره می‌شود. برای جلوگیری از این تغییرات باید اسانس‌ها را در مکانی خشک و خنک و درون ظروف سربسته از جنس شیشه نگهداری نمود. اسانس‌ها در الکل محلول هستند اگرچه به میزان کمی در آب حل می‌شوند. ساختمان شیمیایی آن‌ها مخلوطی از استرها، آلدئیدها، الکل‌ها، ستن‌ها و ترپن‌ها می‌باشد (Momeni and Shahrokhi, 1991). گیاهان حاوی اسانس‌های روغنی به دلیل خواص شفابخش و همچنین عطر مطبوعشان از دوران باستانی به‌عنوان دارو و ادویه جهت درمان بیماری‌ها و همچنین در برخی مراسم مذهبی به‌کار می‌رفتند. بررسی‌های صورت گرفته نشان می‌دهند که استفاده از گیاهان معطر احتمالاً به حدود ده هزار سال قبل از میلاد مسیح بازمی‌گردد اما ریشه‌های کشف روش‌های تقطیر و استخراج اسانس به شیمیدانی به نام ابن‌سینا نسبت داده می‌شود که فرآیند تقطیر با بخار را شرح داده و موفق به اختراع لوله خنک‌کننده مارپیچی جهت آماده‌سازی اسانس و آب معطر شده است (Başer and Buchbauer, 2016). اسانس‌ها را می‌توان در سه دسته اسانس‌های طبیعی، مشابه طبیعی و مصنوعی جای داد. اسانس‌های طبیعی فرآورده‌هایی هستند که از مواد خام گیاهی معطر با یکی از روش‌های تقطیر (آب، بخار، آب و بخار و غیره)، فشردن (فشردن بخش برون‌بر ولایه بیرونی پوست مرکبات) و استخراج با حلال به‌دست می‌آیند. اسانس‌های مشابه طبیعی حاصل ترکیب مواد اولیه معطر بوده و ازنظر بو مشابه اسانس‌های طبیعی می‌باشند و نوع مصنوعی شامل فرآورده‌هایی است که به‌صورت

۱- دانش‌آموخته کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک بیوسیستم، دانشگاه تهران
۲- استاد گروه مهندسی ماشین‌های کشاورزی، دانشگاه تهران
۳- استاد گروه مهندسی ماشین های کشاورزی، دانشگاه تهران
۴- مدیر عامل شرکت آویشن خانه طبیعت سبز
(*- نویسنده مسئول: Email: mohtaseb@ut.ac.ir)
DOI: 10.22067/jam.v9i2.69568
5- Essential Oils
6- Oxidation
7- Resinify

تجاری از مواد شیمیایی آلی مشابه اسانس‌های طبیعی تهیه می‌گردند و بویی مشابه با اسانس‌های طبیعی را دارا می‌باشند (Anonymous, 2004). روش‌هایی که جهت ارزیابی یا تشخیص اسانس‌ها به‌کار می‌روند را می‌توان به دو دسته روش‌های سنتی و نوین تقسیم کرد. نوع سنتی شامل روش‌هایی ازجمله آزمایش وزن مخصوص، محاسبه چرخش نوری، محاسبه ضریب شکست، میزان حلالیت در آب و همچنین محاسبه نقطه‌جوش، ذوب و انجماد می‌شود. در مقابل روش‌هایی که در گروه روش‌های نوین قرار می‌گیرند معمولاً بر اساس روش‌های کروماتوگرافی و طیف‌سنجی هستند، روش‌هایی که قادر به جداسازی و شناسایی ترکیبات نیز می‌باشند. استفاده از روش‌های کروماتوگرافی بر روی اسانس‌ها از سال ۱۹۵۰ میلادی آغازشده و تا به امروز ادامه دارد. ازجمله این روش‌ها می‌توان به کروماتوگرافی گازی، کروماتوگرافی گازی-طیف‌سنجی جرمی[۱]، کروماتوگرافی سریع[۲] (که نیازمند ابزار دقیق با سامانه‌های تزریق نسبت مستقیم است)، کروماتوگرافی گازی چندبعدی[۳]، کروماتوگرافی مایع چندبعدی[۴] و غیره اشاره کرد (Başer and Buchbauer, 2016). این روش‌های تحلیلی نیازمند افراد متخصصی جهت کار با دستگاه بوده و زمان زیادی را برای تحلیل می‌طلبند. همچنین نیازمند آماده‌سازی نمونه بوده و هزینه زیادی را در بردارند (Bhattacharyya and Bandhopadhyay, 2010). در کنار روش‌های تحلیلی از حس بویایی انسان‌های مجرب نیز می‌توان جهت ارزیابی رنگ و بوی اسانس‌ها استفاده کرد. اما این امر زمان‌بر بوده و نیازمند یافتن انسان‌های آموزش‌دیده به تعداد کافی است تا نتایج ارزیابی آن‌ها ازنظر آماری مورد قبول واقع شود (Tiên Do *et al.*, 2015). ذهنیت افراد و خستگی نیز از دیگر معایب استفاده از حس بویایی انسان است (Amy *et al.*, 2015). بینی الکترونیکی[۵] به‌عنوان ابزاری جهت تقلید حس بویایی شناخته می‌شود. این ابزار به‌طورمعمول از آرایه‌ای از حسگرها تشکیل‌شده است که جهت شناسایی و جداسازی انواع بوهای پیچیده و با هزینه اندک به‌کار می‌رود. این آرایه حسگری شامل حسگرهای ساخته‌شده از مواد شیمیایی یا بیولوژیکی حساس به گازهای فرار (بو) می‌باشد. این آرایه قادر به تولید الگوی خاصی از هر رایحه دریافتی است. الگوی هر رایحه شناخته‌شده جهت ساخت یک پایگاه داده و آموزش یک سامانه تشخیص الگو جهت شناسایی رایحه‌های جدید به‌کار می‌رود. خصوصیات بینی الکترونیکی، آن را جهت کاربردهای متنوعی در صنایع غذایی، آرایشی و بهداشتی، داروسازی و همچنین کنترل محیط‌زیست و تشخیص‌های بالینی

1- Gas Chromatography-Mass Spectrometry
2- Fast GC
3- Multidimensional Gas Chromatographic
4- Multidimensional Liquid Chromatographic
5- Electronic Nose

مناسب ساخته است (Peris and Escuder-Gilabert, 2009). بینی الکترونیکی دارای مزایایی چون حساسیت و سرعت زیاد، سادگی، هزینه پایین و غیر مخرب بودن است. همچنین آماده‌سازی نمونه جهت کار با آن به‌صورت مختصر صورت می‌گیرد (Otles, 2008). هرچند که این فناوری نیازمند تعداد زیادی نمونه معتبر است که از معایب آن به‌حساب می‌آید (Tiên Do *et al.*, 2015). از بینی الکترونیکی جهت تشخیص و طبقه‌بندی مواد غذایی و محصولات کشاورزی زیادی استفاده‌شده است که از این محصولات می‌توان به چای (Dai *et al.*, 2015)، عسل (Hajinezhad *et al.*, 2016)، داروهای به‌دست‌آمده از گیاه شاهدانه (Haddia *et al.*, 2011)، قهوه (Brudzewskia *et al.*, 2004) و شیر (Marcone, 2004) اشاره کرد. در زمینه اسانس‌های روغنی نیز می‌توان به توسعه یک سامانه بینی الکترونیکی بر پایه حسگرهای نیمه‌هادی اکسید فلزی جهت طبقه‌بندی ژنوتایپ[۶]‌های یک نوع گل رز (Gorji-Chakespari *et al.*, 2016) و همچنین بررسی عملکرد یک سامانه بینی الکترونیکی جهت تشخیص و کیفیت‌سنجی اسانس ترنج اشاره کرد (Russo *et al.*, 2012). با این‌حال تاکنون پژوهشی در خصوص استفاده از سامانه بینی الکترونیکی برای تشخیص و تفکیک اسانس‌های روغنی مصنوعی (تجاری) مشاهده نشده است. بنابراین هدف از تحقیق حاضر توسعه و ارزیابی یک سامانه بینی الکترونیکی جهت تشخیص و طبقه‌بندی انواع اسانس لیموی تجاری (نوع مصنوعی) می‌باشد.

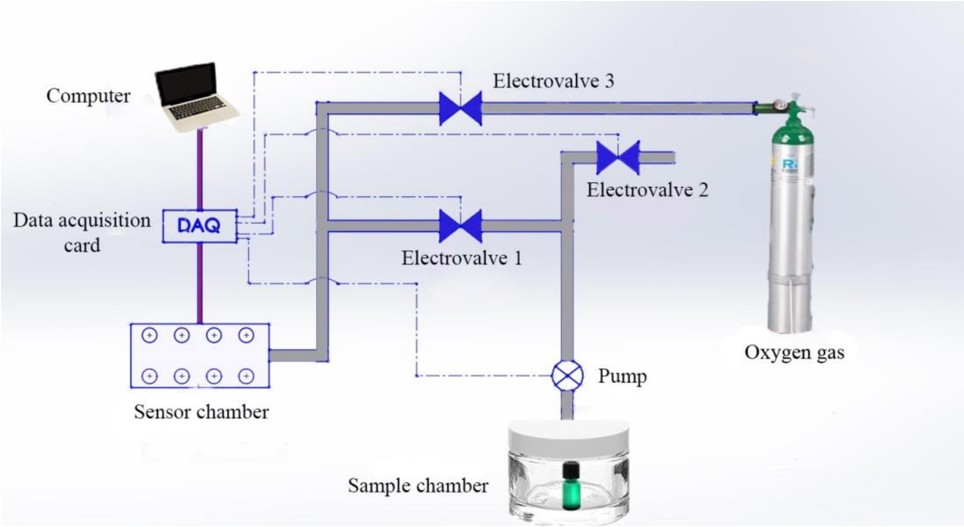
مواد و روش‌ها

به‌منظور تشخیص و طبقه‌بندی هشت نوع اسانس لیمو از نوع تجاری، یک سامانه بینی الکترونیکی توسعه داده‌شده و مورد استفاده قرار گرفت. سامانه ساخته‌شده شامل محفظه حسگرها، محفظه نمونه، آرایه‌ای از حسگرهای گازی، شیرهای برقی، کارت داده‌برداری، پمپ، منبع تغذیه، پردازشگر و منبع تغذیه می‌باشد. شکل ۱ طرح‌واره سامانه را نشان می‌دهد.

آرایه حسگری مورداستفاده شامل هفت حسگر نیمه‌هادی اکسید فلزی، پنج حسگر MQ و دو حسگر TGS می‌باشد. دلیل استفاده از حسگرهای نیمه‌هادی اکسید فلزی در بینی الکترونیکی این است که دارای پایداری شیمیایی بالا بوده، حساسیت زیادی داشته و درعین‌حال ارزان هستند. به‌علاوه برای طیف وسیعی از محصولات کشاورزی قابل‌استفاده می‌باشند (Hyung-Ki *et al.*, 1996). حسگرهای مورد استفاده و موارد کاربرد آن‌ها در جدول ۱ نشان داده‌شده است. به‌منظور دریافت داده‌های مربوط به ولتاژ هر حسگر و همچنین کنترل پمپ و سه شیر الکترونیکی از یک کارت داده‌برداری مدل USB-4704 ساخت شرکت Advantech استفاده شد. این کارت دارای قابلیت

6- Genotypes

دریافت داده‌ها با سرعت ۴۸ KS S^{-1} می‌باشد. جهت دریافت داده‌های مربوط به سیگنال حسگرها و همچنین کنترل پمپ و سه شیر الکترونیکی، سامانه موردنظر در محیط نرم‌افزار Lab View 2012 برنامه‌نویسی شد.



شکل ۱– طرح‌واره سامانه بینی الکترونیکی پیشنهادی

Fig.1. Schematic of proposed electronic nose system

جدول ۱– حسگرهای مورد استفاده در سامانه بینی الکترونیکی و کاربردهای آن‌ها

Table 1- Sensors used in the electronic nose system and their applications

نام **Name**	نشان تجاری **Trade mark**	کاربردهای اصلی **Main applications**
S-1	MQ-9	کربن مونواکسید-گازهای احتراق‌پذیر Co and combustible gases
S-2	MQ-5	ال پی جی و گازهای طبیعی LPG and natural gases
S-3	TGS-822	بخار حلال‌های آلی Organic Solvent Vapors
S-4	TGS-2620	الکل– بخار حلال‌های آلی Alcohol and solvent vapors
S-5	MQ-2	ال پی جی، بوتان، پروپان، متان LPG, butane, propane, methane,
S-6	MQ-136	دی‌اکسید گوگرد Sulfur dioxide
S-7	MQ-135	کنترل کیفیت هوا Air quality control

اسانس‌های مورد استفاده در این پژوهش شامل هشت نوع اسانس تجاری لیمو از نوع مصنوعی بوده که از شرکت آویشن خانه طبیعت سبز مستقر در مرکز رشد پژوهشگاه شیمی و مهندسی شیمی ایران تهیه شدند. نام تجاری این اسانس‌ها به‌صورت کدهای ۱۱۰۶–۱۱۰۸–۱۱۰۹–۹۷۵–۱۱۳۸–۱۱۵۳–۸۱۲۴۱۶–۸۱۲۴۱۷ می‌باشد. طبق اظهارات شرکت تولیدکننده ترکیبات اصلی این اسانس‌ها متشکل از لیمونن[1]، سیترال[2]، نرال[3]، ژرانیول[4]، پاراسایمن[5] است و تفاوت اصلی آن‌ها در نوع اجزا و همچنین غلظت مواد تشکیل‌دهنده آن‌ها است. این اسانس‌ها مطابق با جدول ۲ نام‌گذاری شده و به

1- Limonene
2- Citral
3- Neral
4- Zeranol
5- Para-Cymol

آزمایشگاه گروه مهندسی ماشین‌های کشاورزی پردیس کشاورزی و منابع طبیعی دانشگاه تهران منتقل شدند.

جدول ۲- اسانس‌های لیموی تجاری از نوع مصنوعی مورد مطالعه

Table 2- Synthetic types of commercial lemon essential oils

نوع اسانس Essential oil type	نام تجاری Trade name
A	Code 975
B	Code 1106
C	Code 1109
D	Code 1138
E	Code 812417
F	Code 812416
G	Code 1108
H	Code 1153

هر آزمایش در ۹ تکرار و در سه مرحله ۱- تصحیح خط مبنا (۲۵۰ ثانیه) ۲- تزریق بوی نمونه (۴۰۰ ثانیه) ۳- پاک‌سازی محفظه حسگرها (۲۰۰ ثانیه) انجام شد. نمونه‌های یک گرمی از هر اسانس جهت قرارگیری در محفظه نمونه تهیه شدند. همچنین پیش از شروع هر آزمایش مدت‌زمان ۲۵۰ ثانیه جهت اختلاط گازهای فرار اسانس با هوای داخل محفظه نمونه در نظر گرفته شد. در مرحله اول شیرهای یک و دو بسته بوده و شیر سه جهت عبور اکسیژن از روی حسگرها و رساندن آن‌ها به خط مبنا، فعال می‌شود. در مرحله دوم شیرهای سه و دو بسته‌شده و شیر یک و همچنین پمپ جهت عبور بوی اسانس از روی حسگرها فعال می‌شوند. در مرحله پایانی نیز شیر یک بسته‌شده و شیر سه جهت پاک‌سازی محفظه حسگرها با گاز اکسیژن و همچنین شیر دو و پمپ جهت پاک‌سازی بوی محفظه نمونه فعال می‌شوند. پس از جمع‌آوری داده‌ها و پیش از انجام تحلیل‌های مربوط به تشخیص الگو، لازم است تا اطلاعات به‌دست‌آمده پیش‌پردازش شوند. جهت سهولت در پردازش داده‌ها و همچنین افزایش دقت تشخیص بینی الکترونیکی، یک رابطه تفاضلی (رابطه (۱)) به‌عنوان روش پیش‌پردازش داده‌ها مورد استفاده قرار گرفت (Arshak *et al.*, 2004).

$$Y_s(t) = (X_s(t) + \delta) - (X_s(0) + \delta) = X_s(t) - X_s(0) \qquad (۱)$$

در این رابطه $X_s(0)$ پاسخ خط مبنا قبل از ورود هوای محفظه نمونه به داخل محفظه حسگرها، $X_s(t)$ پاسخ حسگر در زمان t، Y_s پاسخ پیش‌پردازش شده و δ نشان‌دهنده نویز سیگنال‌های به‌دست‌آمده از حسگرها می‌باشد. همچنین با هدف کاهش تعداد توصیف‌گرهای پاسخ حسگرها و کاهش تعداد و پیچیدگی داده‌ها، ماکزیمم پاسخ هر حسگر در مرحله تزریق گاز فضای هد نمونه به‌عنوان یک ویژگی در نظر گرفته شد. درنهایت رابطه (۲) جهت نرمال‌سازی داده‌ها به‌کاربرده شد (Ghasemi-Varnamkhasti, 2017).

$$Y_s^k = (x_s^k - \min_k[x_s^k])/(\max_k[x_s^k] - \min_k[x_s^k]) \qquad (۲)$$

روش‌های زیادی برای تحلیل و طبقه‌بندی داده‌ها وجود دارد. تحلیل مؤلفه‌های اصلی[۱] (PCA) و تحلیل تفکیک خطی[۲] (LDA) دو روش مرسوم در این زمینه می‌باشند. تحلیل مؤلفه‌های اصلی یک روش کارا جهت استخراج مجموعه‌ای کم بعد از تعداد زیادی متغیر می‌باشد. در این روش جهت اولین مؤلفه اصلی، نشان‌دهنده جهتی است که در طول آن بیشترین مشاهدات و بالاترین میزان واریانس داده‌ها قرار دارد و اگر هر جهت دیگری اتخاذ شود، واریانس کمتری از داده‌ها را پوشش خواهد داد (Gareth *et al.*, 2013). همچنین روش تحلیل تفکیک خطی، نسبت واریانس بین کلاس‌های مختلف به واریانس داخل کلاس را با هدف رسیدن به بیشترین میزان تفکیک‌پذیری کلاس‌ها، بیشینه می‌کند. تفاوت اصلی بین روش PCA با LDA در این است که روش LDA داده‌ها را طبقه‌بندی می‌کند. درحالی‌که PCA بیشتر به طبقه‌بندی ویژگی‌ها می‌پردازد. همچنین در روش PCA شکل و مکان داده‌ها هنگام انتقال به یک فضای دیگر تغییر می‌یابد. درحالی‌که LDA مکان داده‌ها را تغییر نمی‌دهد بلکه سعی دارد تا حد امکان کلاس‌های مختلف را از یکدیگر تفکیک داده و یک ناحیه تصمیم‌گیری بین کلاس‌های مختلف ایجاد کند (Balakrishnama and Ganapathiraju, 1998). در این تحقیق، هر دو روش PCA و LDA با استفاده از نرم‌افزار

1- Principle Component Analysis
2- Linear Discriminant Analysis

Unscrambler x10.4 اجرا شدند. همچنین به‌منظور طبقه‌بندی اسانس‌های موجود با استفاده از داده‌های بینی الکترونیکی از روش شبکه عصبی مصنوعی[1] با کمک نرم‌افزار NeuroSolution5 استفاده شد. طبقه‌بندی توسط پرسپترون چندلایه (MLP) با استفاده از روش اعتبارسنجی Leave one out انجام شد. روش leave-one-out یک روش پذیرفته‌شده جهت ارزیابی عملکرد الگوریتم طبقه‌بندی هنگامی‌که تعداد نمونه‌ها کم باشد است. در این روش داده‌ها به n دسته تک عضوی تقسیم می‌شوند که در هر اجرای شبکه یک دسته جهت ارزیابی و n-1 دسته جهت آموزش شبکه به‌کار می‌روند (Rushing *et al.*, 2015). برای ارزیابی روش‌های LDA و ANN از شاخص‌های آماری مستخرج از ماتریس اغتشاش استفاده شد. ماتریس اغتشاش حاوی اطلاعات واقعی و اطلاعات تخمین زده‌شده توسط روش مورد استفاده می‌باشد. برای ارزیابی سامانه پیشنهادی از شاخص‌های آماری نظیر: دقت، صحت، حساسیت، اختصاصی بودن و سطح زیر نمودار با استفاده از روابط (۳) تا (۷) استفاده شد.

$$Accuracy = (n_{TP} + n_{TN})/(n_{TP} + n_{TN} + n_{FP} + n_{FN}) \quad (۳)$$

$$Precision = (n_{TP})/(n_{TP} + n_{FP}) \quad (۴)$$

$$Sensitivity = (n_{TP})/(n_{TP} + n_{FN}) \quad (۵)$$

$$Specificity = (n_{TN})/(n_{TN} + n_{FP}) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (۶)$$

$$AUC = ½((n_{TP})/(n_{TP} + n_{FN}) + (n_{TN})/(n_{TN} + n_{FP})) \quad (۷)$$

که در آن‌ها n_{FP} بیانگر تعداد تصمیمات مثبت ناصحیح، n_{TN} تعداد تصمیمات منفی صحیح، n_{TP} تعداد تصمیمات مثبت صحیح و n_{FN} تعداد تصمیمات منفی ناصحیح هستند (Sokolova and Lapalme, 2009).

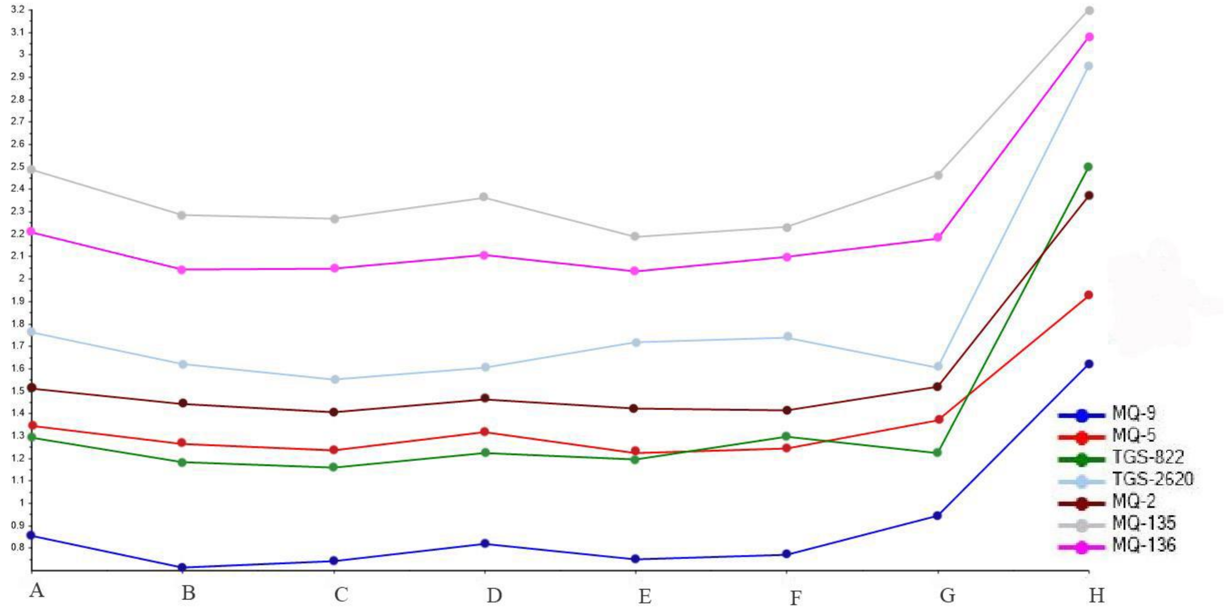
نتایج و بحث

شکل ۲ نشان‌دهنده روند تغییرات پاسخ آرایه حسگری نسبت به رایحه اسانس‌های مختلف لیمو می‌باشد. در این نمودار هر نقطه نشان‌دهنده میانگین پاسخ ۹ تکرار هر حسگر نسبت به رایحه هریک از اسانس‌ها است. محورهای افقی و عمودی به‌ترتیب نشان‌دهنده نمونه‌ها و تغییرات ولتاژ می‌باشند. همان‌طور که مشاهده می‌شود تغییر قابل‌ملاحظه‌ای در پاسخ حسگرها نسبت به نمونه H یعنی اسانس کد ۱۱۵۳ وجود دارد. در صورت صرف‌نظر کردن از آن نمونه، حسگر MQ-135 بیشترین و حسگر MQ-2 کمترین تغییرات را نسبت به نمونه‌های مختلف از خود نشان داده‌اند. به‌منظور تجزیه‌وتحلیل داده‌های به‌دست‌آمده از آرایه حسگری، ابتدا از روش تحلیل مؤلفه‌های اصلی استفاده شد. مؤلفه‌های دربردارنده بیش‌ترین واریانس در داده‌ها بر محور جدیدی توزیع می‌شوند تا نمودار کلاس‌های اسانس‌ها ایجاد شود که این نمودارها به نام نمودارهای اسکور شناخته می‌شوند. در شکل ۳ این نمودارها نشان‌دهنده تمایز خوبی بین اسانس‌های مختلف می‌باشند. دو مؤلفه اصلی PC۱ و PC۲ درمجموع ۹۹ درصد واریانس داده‌ها را پوشش دادند. همان‌طور که مشاهده می‌شود اسانس کد ۱۱۵۳ اختلاف زیادی را نسبت به سایر اسانس‌ها از خود نشان داده است. طبق اظهارات شرکت تولیدکننده این اسانس از لحاظ نوع اجزای تشکیل‌دهنده و غلظت آن‌ها اختلاف بیشتری با سایر کدها دارد. همچنین از نمودار دیگری به نام نمودار لودینگ با ضرایب مقادیر ویژه جهت شناسایی میزان تأثیر پاسخ هرکدام از حسگرها در تحلیل‌های شناسایی الگو استفاده شد (شکل ۴). این نمودار به‌منظور تعیین نقش نسبی حسگرها و تشخیص مؤثرترین آن‌ها در جداسازی نمونه‌ها استفاده می‌شود. مقدار لودینگ هر حسگر روی هر مؤلفه‌ی اصلی بیانگر نقش آن حسگر در تشخیص و تمایز میان گروه‌های مختلف است. مطابق با نمودار تمامی حسگرها دارای ضرایب لودینگ بالایی هستند، اما به دلیل اختلاف کم مقادیر ضرایب حسگرهای MQ9 و MQ5 همچنین حسگرهای MQ2 و MQ135 می‌توان از هریک از این جفت حسگرها، یک حسگر را جهت کاهش پیچیدگی تحلیل داده‌ها و همچنین کاهش هزینه‌های ساخت دستگاه حذف کرد. همچنین عملکرد روش LDA به‌صورت نمودار اسکور در شکل ۵ نمایش داده‌شده است. نتایج روش تحلیل تفکیک خطی نشان داد که این روش قادر به تفکیک هشت نوع اسانس لیمو با دقت بالای ۹۸ درصد می‌باشد. جدول ۳ بیانگر ماتریس اغتشاش حاصل از این روش و جدول ۴ مقادیر شاخص‌های آماری مربوط به این ماتریس اغتشاش را نشان می‌دهد.

همان‌طور که در جدول ۴ مشخص شده است بهترین عملکرد روش LDA مربوط به کلاس‌های B، C، G و H بوده است. در این کلاس‌ها مقادیر تمامی شاخص‌های آماری برابر ۱۰۰ درصد به‌دست آمد که بیانگر موفق بودن روش پیشنهادی در طبقه‌بندی نمونه‌های مربوط به این ۴ کلاس می‌باشد. کمترین میزان حساسیت برای کلاس‌های D و F با مقدار ۸۸/۸۸ بوده که نشان‌دهنده پیچیده بودن فرآیند طبقه‌بندی در این دو کلاس توسط روش LDA است. لازم به ذکر است شاخص اختصاصی بودن نیز از شاخص‌های مهم تحلیل ماتریس اغتشاش می‌باشد که می‌تواند تداخل بین کلاس‌های مختلف را بررسی نماید؛ مقدار این شاخص در جدول ۴ برای کلاس‌های B، C، D، F، G و H برابر ۱۰۰ و تنها در کلاس‌های A و E برابر ۹۸/۴۱ به‌دست آمده است که دلیل آن تداخل جزئی نمونه‌ها در این دو کلاس با کلاس‌های D و F بوده است. این مسئله می‌تواند از نزدیک بودن ویژگی‌های کلاس‌های A و E با D و F باشد. ثنایی فر و همکاران نیز به‌منظور بررسی و ارزیابی یک حسگری گازی در مراحل مختلف رسیدگی موز، از روش تحلیل تفکیک خطی استفاده کردند. آن‌ها با استفاده از این روش موفق شدند دوره‌های مختلف

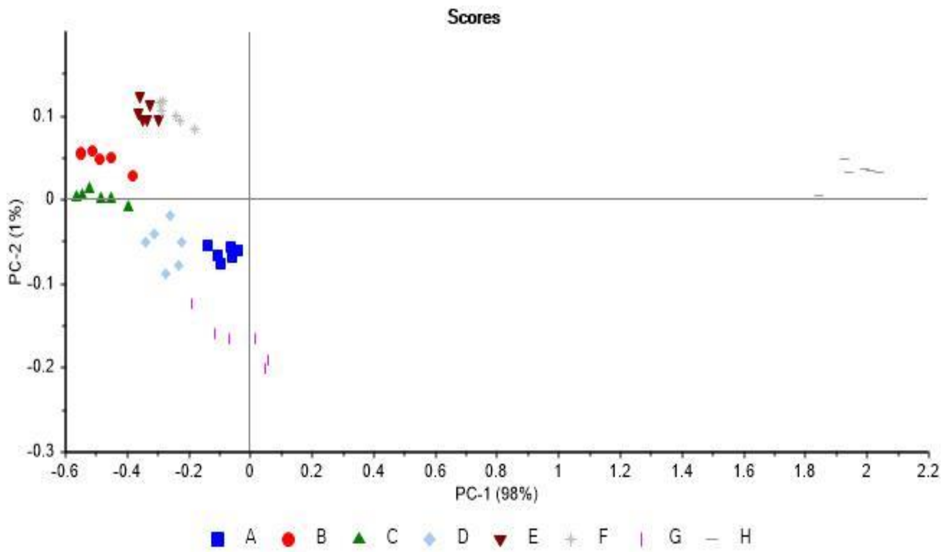
1- Artificial Neural Network

رسیدگی موز را با دقت ۹۷/۳ درصد طبقه‌بندی کنند (Sanaeifar *et al.*, 2014). روش شبکه عصبی مصنوعی نیز جهت طبقه‌بندی اسانس‌های لیمو استفاده شد. در این روش هفت نرون (متناسب با تعداد حسگرها) به‌عنوان ورودی شبکه، و هشت نرون (با توجه به تعداد نمونه‌ها) به‌عنوان خروجی شبکه ایجاد شد. همچنین تعداد نرون‌های لایه مخفی شبکه با استفاده از روش سعی و خطا، یک نرون تعیین شد. بنابراین شبکه با ساختار ۷-۱-۸ به‌دست آمد. در آموزش این شبکه از تابع انتقال تانژانت هایپربولیک و روش یادگیری ممنتوم استفاده شد. ماتریس اغتشاش حاصل از این شبکه در جدول ۵ نشان داده‌شده است.



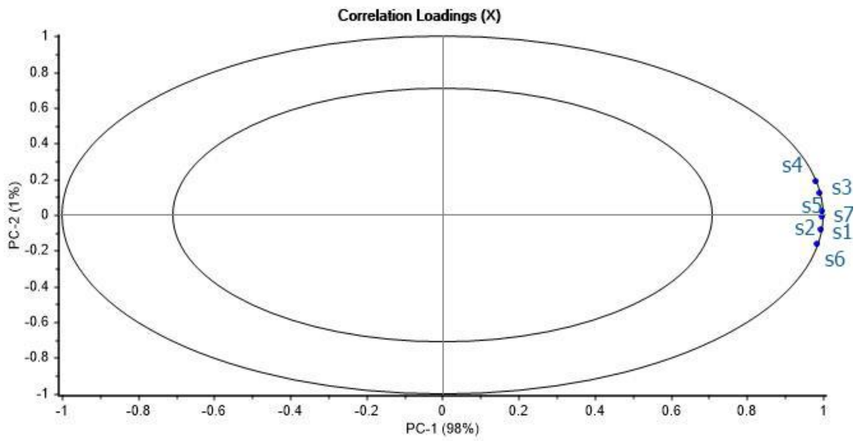
شکل ۲– تغییرات آرایه حسگری نسبت به اسانس‌های تجاری لیمو

Fig.2. Sensor array changes relative to commercial lemon essential oil



شکل ۳– نمودار اسکور PCA برای هشت نوع اسانس لیموی تجاری

Fig.3. Score plot of PCA for eight types of commercial lemon essential oil



شکل ٤- نمودار لودینگ آرایه حسگری مربوط به دو مؤلفه اصلی
Fig.4. Loading plot of sensor array related to two main components

جدول ۳- ماتریس اغتشاش طبقه‌بندی LDA برای هشت نوع اسانس لیمو
Table 3- LDA confusion matrix for eight types of lemon essential oils

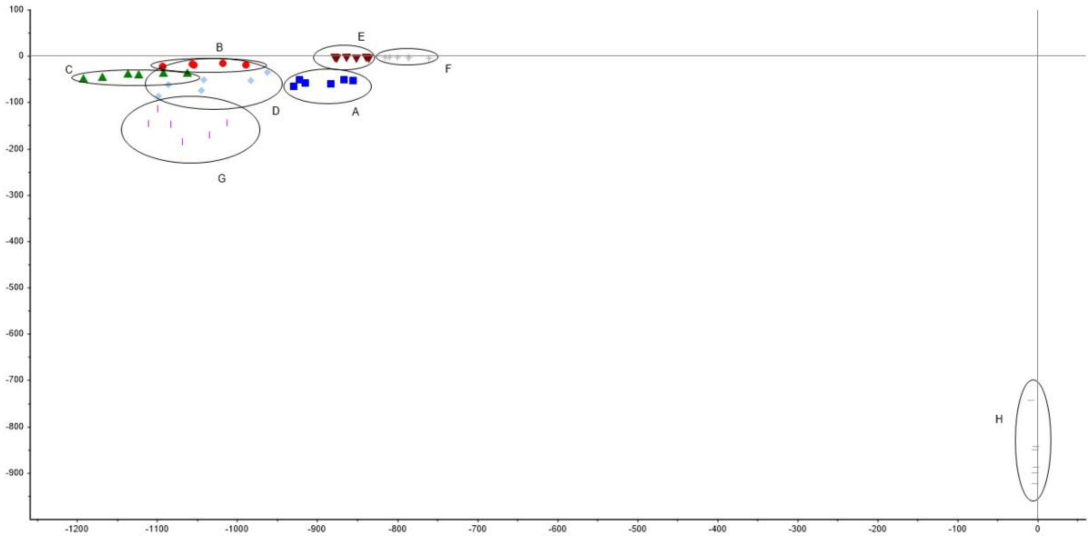
نمونه Sample	A	B	C	D	E	F	G	H
A	9	0	0	1	0	0	0	0
B	0	9	0	0	0	0	0	0
C	0	0	9	0	0	0	0	0
D	0	0	0	8	0	0	0	0
E	0	0	0	0	9	1	0	0
F	0	0	0	0	0	8	0	0
G	0	0	0	0	0	0	9	0
H	0	0	0	0	0	0	0	9

جدول ۶ نیز نمایش‌دهنده مقادیر شاخص‌های آماری مربوط به ماتریس اغتشاش است. همان‌طور که مندرجات جدول ۶ نشان می‌دهد، بهترین عملکرد روش مبتنی بر شبکه‌های عصبی مصنوعی مربوط به کلاس‌های A و H است. در این کلاس‌ها مقادیر تمامی شاخص‌های آماری برابر ۱۰۰ درصد به‌دست آمد. کمترین میزان شاخص دقت طبقه‌بندی مربوط به کلاس D با مقدار ۹۱/۶۶ بوده که بیانگر پیچیده بودن فرآیند طبقه‌بندی در این کلاس می‌باشد. مقدار شاخص حساسیت برای کلاس‌های B، C، E، F و G برابر ۸۸/۸۸ بود؛ این در حالی است که این مقدار برای کلاس D برابر ۶۶/۶۶ درصد به‌دست آمد. یکی از دلایل پایین بودن تمامی شاخص‌ها در کلاس D تداخل سایر کلاس‌ها مانند B، C و G می‌باشد که می‌توان یکی از دلایل آن را تطابق ویژگی‌های مربوط به نمونه‌های این دسته با سایر دسته‌ها دانست. همچنین نتایج مربوط به عملکرد شبکه عصبی مصنوعی در جدول ۷ نشان داده‌شده است. نمونه‌های H و A میانگین مربعات خطای بسیار کم و ضریب همبستگی بالایی را به خود اختصاص داده‌اند. بیشترین میانگین مربعات خطا و کمترین ضریب همبستگی نیز مربوط به نمونه D می‌باشد. حیدربیگی و همکاران نیز از روش شبکه عصبی مصنوعی جهت تشخیص تقلب در زعفران استفاده کردند. دقت این روش در تشخیص دو نوع تقلب ۱۰۰ و ۸۶/۸۷ درصد گزارش‌شده است (Heidarbeigi *et al.*, 2015).

جدول ٤- مقادیر شاخص‌های آماری مربوط به ماتریس اغتشاش به‌دست‌آمده برای هشت نوع اسانس لیمو با طبقه‌بند LDA

Table 4- The values of the statistical indices associated with the confusion matrix for the eight types of lemon essential oils with the LDA classifier

کلاس Class	سطح زیر منحنی AUC	اختصاصی بودن Specificity	حساسیت Sensitivity	صحت Precision	دقت طبقه‌بندی Accuracy
A	99.2	98.41	100	90	98.61
B	100	100	100	100	100
C	100	100	100	100	100
D	94.44	100	88.88	100	98.61
E	99.2	98.41	100	90	98.61
F	94.44	100	88.88	100	98.61
G	100	100	100	100	100
H	100	100	100	100	100



شکل ۵- نمودار اسکور تحلیل تفکیک خطی برای اسانس‌های مختلف لیمو

Fig.5. LDA plot for different lemon essential oils

جدول ۵- ماتریس اغتشاش طبقه‌بندی شبکه عصبی مصنوعی برای نمونه‌های اسانس لیمو

Table 5- ANN confusion matrix for classification of lemon essential oils

نمونه Sample	A	B	C	D	E	F	G	H
A	9	0	0	0	0	0	0	0
B	0	8	0	0	0	0	0	0
C	0	0	8	0	0	0	0	0
D	0	1	1	6	0	0	1	0
E	0	0	0	0	8	1	0	0
F	0	0	0	0	1	8	0	0
G	0	0	0	3	0	0	8	0
H	0	0	0	0	0	0	0	9

جدول ٦- مقادیر شاخص‌های آماری مربوط به ماتریس اغتشاش به‌دست‌آمده برای هشت نوع اسانس لیمو با طبقه‌بند ANN

Table 6- The values of the statistical indices associated with the confusion matrix for the eight types of lemon essential oils with the ANN classifier

کلاس Class	سطح زیر منحنی AUC	اختصاصی بودن Specificity	حساسیت Sensitivity	صحت Precision	دقت طبقه‌بندی Accuracy
A	100	100	100	100	100
B	94.44	100	88.88	100	98.61
C	94.44	100	88.88	100	98.61
D	80.94	95.23	66.66	66.66	91.66
E	93.64	98.41	88.88	88.88	97.22
F	93.64	98.41	88.88	88.88	97.22
G	92.05	95.23	88.88	72.72	94.44
H	100	100	100	100	100

جدول ۷- عملکرد شبکه عصبی مصنوعی برای طبقه‌بندی اسانس‌های لیمو

Table 7- Performance of artificial neural network for the classification of lemon essential oils

نمونه/عملکرد Performance/Sample	A	B	C	D	E	F	G	H
میانگین مربعات خطا MSE	0.0173	0.0249	0.0206	0.3338	0.022	0.0249	0.0107	0
ضریب همبستگی R	0.931	0.885	0.902	0.843	0.904	0.882	0.955	0.999

نتیجه‌گیری

بینی الکترونیکی بر پایه حسگرهای نیمه‌هادی اکسید فلزی ابزاری قدرتمند می‌باشد که می‌تواند به‌عنوان جایگزینی برای روش‌های سنتی به‌کار رود. در این تحقیق ابتدا یک سامانه بینی الکترونیکی بر پایه حسگرهای نیمه‌هادی اکسید فلزی توسعه داده‌شده و سپس جهت تشخیص و تفکیک هشت نوع اسانس لیموی تجاری از نوع مصنوعی، مورد استفاده قرار گرفت. پاسخ حسگرهای بینی الکترونیکی به ترکیبات فرار نمونه‌های اسانس‌ها توسط روش‌های تحلیل مؤلفه‌های اصلی، تحلیل تفکیک خطی و شبکه عصبی مصنوعی مورد پردازش قرار گرفت. نتایج تحلیل مؤلفه‌های اصلی نشان داد که دو مؤلفه اصلی اول قادر به توصیف ۹۹ درصد از واریانس داده‌ها می‌باشند. همچنین جهت تفکیک اسانس‌های موردمطالعه نتایج روش LDA نشان داد که این روش دقت بالاتری نسبت به شبکه عصبی مصنوعی در تفکیک نمونه‌ها دارد، به‌طوری‌که با دقت بالای ۹۸ درصد قادر به جداسازی نمونه‌ها می‌باشد. بطور کلی نتایج این پژوهش نشان داد سامانه بینی الکترونیکی بر پایه حسگرهای نیمه‌هادی اکسید فلزی قابلیت تشخیص و تفکیک اسانس‌های تجاری لیمو را دارد. با توجه به گستردگی و اقتصادی بودن بحث اسانس و عدم وجود سابقه استفاده از سامانه بینی الکترونیکی در آن زمینه، پیشنهاد می‌شود کاربردهای این فناوری در مورد اسانس محصولات مختلف بیشتر مورد تحقیق و بررسی قرار گیرد.

References

1. Amy, L., C. Silvia, K. Ganesh, S. Prabakaran, and B. John. 2015. Electronic Noses for Food Quality: A Review. Journal of Food Engineering 144: 103-111.
2. Anonymous. 2004. Minimum criteria for the establishment and operation of essential oils, distillate and plant extracts for food, Beverage, cosmetic and sanitary purposes. Department of Food, Beverage, Cosmetics and Food Supervision. Food and Drug Administration, Ministry of Health.
3. Arshak, K., E. Moore, G. M. Lyons, J. Harris, and S. Clifford. 2004. A review of gas sensors employed in electronic nose applications. Sensor Review 24: 181-198.
4. Balakrishnama, S., and A. Ganapathiraju, 1998. Linear discriminant analyses - A brief tutorial. Institute for Signal and Information Processing, Department of Electrical and Computer Engineering. Mississippi State University. USA
5. Başer, K., and G. Buchbauer. 2016. Handbook of essential oils: science, technology, and applications (second edition). Taylor & Francis Group.

6. Bhattacharyya, N., and R. Bandhopadhyay. 2010. Electronic Nose and Electronic Tongue Nondestructive Evaluation of Food Quality. pp. 73-100.
7. Brudzewskia, K., S. Osowskib, and T. Markiewiczb. 2004. Classification of milk by means of an electronic nose and SVM neural network. Sensors and Actuators B: Chemical 98: 291-298.
8. Dai, Y., R. Zhi, L. Zhao, H. Gao, B. Shi, and H. Wang. 2015. Longjing tea quality classification by fusion of features collected from E-nose. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 144: 63-70.
9. Gareth, J., W. Daniela, H. Trevor, and T. Robert. 2013. An Introduction to Statistical Learning. Springer Texts in Statistics Volume 103.
10. Ghasemi-Varnamkhasti, M. 2017. Fabrication and development of a machine olfaction system combined with pattern recognition techniques for detecting formalin adulteration in raw milk. Iranian Journal of Biosystems Engineering 47: 761-770.
11. Gorji-Chakespari, A., A. M. Nikbakht, F. Sefidkon, M. Ghasemi-Varnamkhasti, and E. L. Valero. 2016. Classification of essential oil composition in Rosa damascena Mill. genotypes using an electronic nose. Journal of Applied Research on Medicinal and Aromatic Plants 4: 27-34.
12. Haddia, Z., A. Amaria, H. Alamia, N. El Barib, E. Llobetc, and B. Bouchikhi. 2011. A portable electronic nose system for the identification of cannabis-based drugs. Sensors and Actuators 155: 456-463.
13. Hajinejad, M., S. S. Mohtasebi, M. Ghasemi-varnamkhasti, and M. Aghbashlou. 2015. Classification of different floral origin and adulterated honeys using an olfaction machine. Iranian Journal of Biosystems Engineering 47: 415-423. (In Farsi).
14. Heidarbeigi, K., S. S. Mohtasebi, A. Foroughirad, M. Ghasemi-Varnamkhasti, Sh. Rafiee, and K. Rezaei. 2015. Detection of adulteration in saffron samples using electronic nose. International Journal of Food Properties 18: 1391-1401.
15. Hyung-Ki, H., W. Hyun, H. Dong, K. Seung-Ryeol, H. Chul, L. Kyuchung, and M. Toyosaka. 1996. E-nose system with micro-gas sensor array Sensors and Actuators B: Chemical 36: 338-341.
16. Marcone, M. F. 2004. Composition and properties of Indonesian palm civet coffee. Food Research International 37: 901-912.
17. Momeni, T. and N. Shahrokhi. 1991. Essential oils and their therapeutic actions. Tehran, Iran: University of Tehran. (In Farsi).
18. Otles, S. 2008. Handbook of Food Analysis Instruments. CRC Press.
19. Peris, M., and L. Escuder-Gilabert. 2009. A 21st century technique for food control: Electronic noses. Analytica Chimica Acta 638: 1-15.
20. Rushing, C., A. Bulusu, H. I. Hurwitz, A. B. Nixon, and H. Pang. 2015. A leave-one-outcross-validation SAS macro for the identification of markers associated with survival. Computers in Biology and Medicine 57: 123-129.
21. Russo, M., D. Serra, F. Suraci, and S. Postorino. 2012. Effectiveness of electronic nose systems to detect bergamot (Citrus bergamia Rissoet Poiteau) essential oil quality and genuineness. The Journal of Essential Oil Research 24: 137-151.
22. Sanaeifar, A., S. S. Mohtasebi, M. Ghasemi-Varnamkhasti, and H. Ahmadi. 2015. Design, Construction and Performance Evaluation of a Metal Oxide Semiconductor (MOS) Based Machine Olfaction (Electronic Nose) for Monitoring of Banana Ripeness. Journal of Agricultural Machinery 5 (1): 111-121.
23. Sokolova, M., and G. Lapalme. 2009. A systematic analysis of performance measures for classification tasks. Information Processing and Management 45: 427-437.
24. Tiên Do, T. K., F. Hadji-Minaglou, S. Antoniotti, and X. Sylvain. 2015. Authenticity of essential oils. Trends in Analytical Chemistry 66: 146-157.

Journal of Agricultural Machinery
Vol. 9, No. 2, Fall - Winter 2019, p. 253-263

نشریه ماشین‌های کشاورزی
جلد ۹، شماره ۲، نیمسال دوم ۱۳۹۸، ص ۲۶۳-۲۵۳

Development and Evaluation of an Electronic Nose System Based on MOS Sensors to Detect and to Distinguish Lemon Essential Oils

P. Fayyaz[1]- S. S. Mohtasebi[1*]- A. Jafari[1]- A. Masoudi[2]

Received: 20-12-2017
Accepted: 29-04-2018

Introduction

Essences or essential oils are aromatic compounds that are found in different organs of the plants. Essences can be classified into three groups of natural, synthetic and natural like. Most of the methods that are used to detect and to distinguish essential oils are based on chromatographic methods. However, these analytical methods are time consuming and require expert operators to work with required devices. Moreover, it is necessary to prepare the samples. An electronic nose is known as a tool for mimicking the sense of smell. This tool usually consists of an array of sensors which are used to identify and to isolate a variety of complex odors at a low cost. Since there has been no research on the usage of an electronic nose system for detection and separation of essential oils, the purpose of this study is to develop and to evaluate an electronic nose system for identification and classification of various types of commercial lemon essential oils (synthetic types).

Materials and Methods

The proposed system consists of a sensor chamber, a sample chamber, an array of MOS sensors, electro valves, a pump, a data acquisition cart and, a processor. Essential oils used in this study includes eight types of synthetic commercial lemon essential oils that were prepared by ((Avishan Khane Tabiat Sabz)) Company located in chemistry and chemical engineering research center of Iran. One gram sample of each essential oil was prepared to be placed in the sample chamber. Each experiment was carried out in 9 replicates and in three stages of 1- Baseline correction (250 s) 2- Sample smell injection (400 s) and 3- Sensors chamber cleaning (200 s). Data received from the sensors signals were initially preprocessed and normalized and then three methods of principal component analyses (PCA), linear discriminant analyses (LDA) and artificial neural network (ANN) were used to process the data. Both PCA and LDA methods were run using the Unscramble x10.4 software and the artificial neural network was used with the help of NeuroSolution 5 software. In ANN, the classification was carried out using a multilayer perceptron (MLP) and Leave-one-out technique. Leave-one-out is an acceptable method for evaluating the performance of the classification algorithms when the number of samples is low.

Results and Discussion

In order to analyze the data obtained from the sensor array, first, the principal components analysis (PCA) method was used. In this method, the first two principal components of PC 1 and PC 2 totally covered 99% of the data variance. Another plot called as loading plot was used to determine the effects of each sensor responses in pattern recognition analyzes. According to this plot, all sensors had high loading coefficients. In case of distinguishing the lemon essential oils, the results of the linear discriminant analysis (LDA) method showed that this method can distinguish eight types of lemon essential oils with an accuracy of %98. The artificial neural network (ANN) also separated the essential oils with the accuracy of the above %91.

Conclusions

An Electronic nose system based on semiconductor metal oxide sensors is a powerful tool that can be used as a substitute for traditional methods. In general, this study showed that the electronic nose system based on MOS sensors has the ability to detect and to distinguish commercial lemon essential oils. Considering the wide ranges and economical nature of the essential oils, it is suggested that applications of the electronic nose can be more expanded in the subject of the essential oils of different products.

Keywords: ANN, Electronic nose, Essential oil, LDA, PCA

1- Department of Agricultural Machinery, Faculty of Agricultural Engineering and Technology, University of Tehran, Karaj, Iran
2- Managing director of Avishan Khane Tabiat Sabz.co
(*- Corresponding Author Email: mohtaseb@ut.ac.ir)